



TITLE:

# Theoretical Study of Electron Dynamics in Multi-Orbital Antiferromagnetic Metals( Abstract\_要旨 )

AUTHOR(S):

Sugimoto, Koudai

---

CITATION:

Sugimoto, Koudai. Theoretical Study of Electron Dynamics in Multi-Orbital Antiferromagnetic Metals. 京都大学, 2015, 博士(理学)

ISSUE DATE:

2015-03-23

URL:

<https://doi.org/10.14989/doctor.k18780>

RIGHT:

許諾条件により要旨は2015/04/01に公開; Fig. 1.6. Reprinted with permission from T. Morinari et al. Copyright 2010 American Physical Society. Fig. 1.7. Reprinted with permission from S. Ishida et al. Copyright 2013 American Chemical Society.

( 続紙 1 )

京都大学	博 士（理 学）	氏名	杉本 高大
論文題目	Theoretical Study of Electron Dynamics in Multi-Orbital Antiferromagnetic Metals（多軌道反強磁性金属における電子励起の理論研究）		
(論文内容の要旨)			
<p>固体中の電子には、スピン自由度の他に、その電子が、結晶を構成する各イオンのどのような軌道を占有しているか、という軌道の自由度を持つことが知られている。3d 遷移金属元素などを含む系では、5 個の軌道があり、これらが格子の自由度、スピンの自由度などと結合して大変豊かな物性を生み出すことはよく知られている。また、最近の鉄系超伝導体の研究の発展に伴い、スピンダイナミクスにおける多軌道の効果が注目されている。しかしながら、遷移金属元素を含む金属の輸送現象、ダイナミクスの理論的解析において、しばしば簡単化のためにこのような軌道の存在は無視されてきた。本論文の目的は、多軌道の存在が、スピン密度波金属相における電気抵抗、共鳴非弾性 X 線散乱（R I X S）などにどのように効いてくるかを明らかにする、というものである。具体的には、鉄系超伝導の母物質の反強磁性金属相における電気抵抗の面内異方性と金属クロムのスピン密度波相における非弾性共鳴 X 線散乱の 2 つを例として取り上げている。</p> <p>第 2 章ではまず、3 d 電子系のモデルとして導入した多軌道ハバードモデルに対して平均場近似を行い、自己無撞着に決められる秩序パラメータを含む平均場ハミルトニアンをスピン密度波状態に対して導出した。この平均場ハミルトニアンが以下の取り扱いの基礎となる。続いて、電気伝導度の計算に必要な電気伝導度の久保公式と記憶関数法、共鳴非弾性散乱の解析に用いる動的帯磁率など、第 3 章以降で必要となる手法、公式などが説明されている。</p> <p>続いて第 3 章では、鉄系超伝導体の（ストライプ）反強磁性金属相において観測されている電気抵抗の面内異方性の理論的解析を行った。さまざまな実験結果から、電子ドーピング系において鉄原子を置換したコバルト原子による不純物散乱が寄与していることが示唆されるが、何が本質的な原因なのかは不明であった。杉本氏は、電子ドーピング系における置換された鉄サイトの効果を不純物ポテンシャルとして取り込み、第 2 章で求めた平均場ハミルトニアンから出発して、久保公式と記憶関数法を組み合わせることで電気抵抗を求めた。その結果、実験結果と定性的に矛盾しない電気抵抗の異方的な振る舞いが得られたが、異方性を生む要因を個別に検討すると、異方性の主因は記憶関数に含まれる緩和時間の異方性であること、すなわちストライプ反強磁性秩序の異方性だけでなく不純物散乱の効果も重要であることがわかった。緩和時間の異方性はフェルミ面の形状を通じてドーピング量に依存して変化する。また、上記の計算では軌道秩序の効果は考慮していないが、同様の計算を軌道秩序もあらわに取り入れたモデル（ただしゼロドーピング）に対して行い、不純物散乱を考慮することで初めて実験と定性的に矛盾しない結果が得られることも示した。本章の内容は公表論文 1 に発表されている。</p> <p>第 4 章では、クロムのスピン密度波金属相における動的性質の考察を行った。クロムのスピン励起はこれまで光学伝導度、中性子散乱、NMR などの手法で研究されてきたが、本論文では特に、中性子ではカバーできない高エネルギー領域の励起をも探る</p>			

ことのできるプローブとして近年注目されている非弾性X線散乱に注目した。多軌道系の計算においてフェルミ面の構造は重要であるが、従来知られている飛び移り積分のデータはクロムのフェルミ面の構造を正確に再現できないことがわかっているので、まず第一原理計算により今回新たに飛び移り積分を求めた。

次に、第2章の平均場近似に基づいてスピン密度波相の電子構造を求めたが、その際、解析が著しく煩雑になるのを避けるために、本来は非整合であるスピン密度波を整合なもので近似した。これらの結果をもとに、乱雑位相近似の枠内で（1）光学伝導度、（2）動的スピン帯磁率、（3）共鳴非弾性X線散乱の強度、の3つを計算した。得られた光学伝導度はピーク構造を示すが、その位置はクロムの実験結果とは余り良い一致を示さなかった。これは本研究で本来非整合なスピン密度波を整合なもので近似したことによるものと考えられる。次に、動的スピン帯磁率を計算し、スピン励起を調べたところ、磁気ブリルアンゾーンの中心付近に線形のギャップレス集団励起（スピン波）があることがわかった。この励起は、高エネルギーでは電子-空孔の個別励起に減衰する。

最後に、更に高エネルギーの領域を探るために、第2章で得られた理論に従って非弾性X線散乱の強度を計算した。その結果、上のスピン波モードよりも更に高いエネルギーに、異なる軌道に由来するバンド間遷移に対応する非常にブロードかつ高強度のピークがあることがわかった。このピークの存在のため、動的スピン帯磁率で見られたスピン波モードに対応するピークの強度は非常に弱くなる。このような現象は、バンド間遷移が存在しない単一バンドのモデルでは起こりえず、多軌道の存在が本質的な現象であると見ることができる。第4章の内容は公表論文2として発表されている。

(続紙 2 )

(論文審査の結果の要旨)

本論文の内容は、理論的取り扱いにおいてしばしば無視される多軌道の効果が遍歴電子系（特に遷移金属）の動的性質にどのようにきいてくるかを、多軌道モデルに対する平均場近似を出発点にして解析した、というものである。具体的には、鉄系超伝導体の電気伝導、クロムのスピン密度波状態における共鳴X線散乱の2つのケースについて、線形応答、記憶関数法などを用いて考察している。杉本氏のオリジナルな結果は第3章、第4章にまとめられている。

第3章の電気抵抗の異方性の理論では、実験結果の再現を目標としているにもかかわらず、必ずしも現実の実験の状況に即していない設定を用いているなど、今後の検討の余地があると思われる。しかし、既存の理論とは一線を画して、異方性の発現における不純物散乱の重要性を強調しており、理論の予言としては十分に意味がある。また、第4章のスピンダイナミクスの理論は、多軌道系では、大きなウェイトを持つバンド間遷移が許されるために、中性子非弾性散乱では観測される集団励起モードの強度が、共鳴非弾性X線散乱では著しく抑制されることを示唆するなど、観測可能な軌道の効果も予言しており、実験的にも大変興味深い。全体として、これまであまり顧みられてこなかった「遍歴電子系のダイナミクスにおける多軌道の効果」という問題に着目して、さまざまな標準的手法を巧みに組み合わせながら、これをいち早く解析したという着眼点は大いに評価できる。更に、現在杉本氏の結果に基づいて進行中の実験の結果とも併せて、今後のこの分野の進展のきっかけになるとも思われる。よって、本論文は博士（理学）の学位論文として価値あるものと認める。

平成27年1月16日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行った。本人の体調不良のため、最後の部分の発表内容は大幅に割愛せざるを得なかったが、発表を行った部分に関しては質疑応答など、全く問題なかったので合格と認めた。

要旨公表可能日： 2015年 4月 1日以降